

水分特性曲線の回帰プログラム SWRC Fit (3) 回帰アルゴリズム

著者	関 勝寿
著者別名	Katsutoshi SEKI
雑誌名	東洋大学紀要 自然科学篇
巻	63
ページ	29-39
発行年	2019-03
URL	http://id.nii.ac.jp/1060/00010468/

水分特性曲線の回帰プログラム SWRC Fit (3) — 回帰アルゴリズム —

関 勝寿*

Program for fitting water retention curve SWRC Fit (3)
— Algorithm of fitting —

Katsutoshi SEKI*

Abstract

Estimation of hydraulic parameters is important for describing water movement in soil. SWRC Fit (<http://purl.org/net/swrc/>) is a program for fitting soil hydraulic models to measured soil water retention data. As the theoretical background was fully discussed in the previous articles of this series, this article focuses on the algorithm of the fitting of unimodal models (Brooks and Corey model, van Genuchten model, Kosugi model and Fredlund and Xing model). In non-linear fitting algorithm, determination of the initial parameter set for the iterative procedure is crucial. In SWRC Fit, successive determination of initial parameter set from simple model to more complex ones is a key algorithm for the parameter determination.

Keywords : water retention curve, hydraulic model, parameter estimation

1. 序論

土壌中の不飽和水分移動を解析するときに、土壌の水分移動特性パラメータを決定することが必要とされる。そのためには、土壌水分特性曲線の実験データをモデル式に非線形回帰することで最適なモデルのパラメータを決定することが必要とされる。本稿の著者は、水分特性曲線の非線形回帰プログラムSWRC Fitを作成して、関 (2007) に GNU Octave のプログラムを公開した。その後、Webから簡単に実行できるバージョンを作成

*) 東洋大学自然科学研究室 〒112-8606 東京都文京区白山 5-28-20

Natural Science Laboratory, Toyo University, 5-28-20 Hakusan, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8606, Japan

して、Seki (2007) で発表した (<http://purl.org/net/swrc/>)。Seki (2007) は、Google Scholar Citationsによれば本稿執筆時点で150 件以上の被引用数があり、SWRC Fitが多くの研究者に使われていることを示している。

この一連の論文では、SWRC Fitについての解説を続けている。シリーズの初回 (関, 2017) では、水分特性モデルについて教科書的な話からはじめ、SWRC Fit で扱っている土壤水分モデルについて1つ1つ丁寧に解説した。解説をしたモデルは、4つの単峰性モデルと2つの二峰性モデルである。ここで、4つの単峰性モデルとはBrooks and Corey (1964) のBCモデル、van Genuchten (1980) のVGモデル、Kosugi (1996) のLNモデル、Fredlund and Xing (1994) のFXモデルである。そして、2つの二峰性モデルはいずれも多峰性モデルの特殊例であり、VGモデルの線型結合であるDurner (1994) のDBモデル、LNモデルの線型結合であるSeki (2007) のBLモデルである。関 (2017) では、これら6つのモデルそれぞれについて、水分特性曲線の式の特徴、不飽和透水係数の式を導出するための方法などについて詳しく述べた。したがって、本稿ではそれを繰り返すことはしない。また、使われている記号は同じものであり、式や図も適宜関 (2017) を引用して進める。

シリーズ2回目の関 (2018) ではSWRC Fitのプログラムの実行方法を解説した。SWRC Fitには、Webブラウザから直接実行できるオンラインバージョンと、PCにインストールして端末エミュレータから実行できるオフラインバージョンがあり、オンラインバージョンではオフラインバージョンのプログラムを内部的に呼び出して実行する構造となっている。

本稿では、単峰性モデルの非線形回帰アルゴリズムを解説する。Seki (2007) では、3つの単峰性モデルと2つの二峰性モデルについてアルゴリズムが解説されているが、当時はまだFXモデルが実装されていなかったため、FXモデルの回帰アルゴリズムについては未発表である。

2. 非線形回帰について

2.1. 最適化の手法

具体的なアルゴリズムに入る前に、非線形回帰による最適化を定式化する。土壤水分モデルはサクション x から体積含水率 y を計算する関数 $y=f(x)$ である。関数 $y=f(x)$ には複数のパラメータが含まれるため、パラメータをベクトル表記して \boldsymbol{p} とすると、モデル関数を $f(x, \boldsymbol{p})$ と書くことができる。そして、実験によって得られた (x, y) の測定値の n 個の組 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ が与えられたときに、最もこの測定値とよく適合するような $f(x, \boldsymbol{p})$ を与える \boldsymbol{p} を知りたい、ということが解こうとしている問題である。

ここで「最も測定値とよく適合する」ということは、残差の平方和

$$O = \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 \quad (1)$$

を最小とすることを意味する、という最小二乗法の考え方が一般的である。すなわち最小化しようとする残差平方和を目的関数とすると、データの組 (x_i, y_i) は与えられているため、目的関数はパラメータベクトルの関数となる。

モデル関数が線形関数のときには、正規方程式を解くことによってそのような \mathbf{p} を計算することができるが、非線形関数のときには一般にそのような手法を使うことができない。そのため、通常は反復解法を用いて \mathbf{p} の最適解を求める。反復解法とは、最初に「なにか適当なパラメータの推定値 \mathbf{p}_0 」を与えて、そこから「より適当なパラメータの推定値 \mathbf{p}_1 」を見つけ、そこからさらに $\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \dots$ と順次より良いパラメータを推定するということを反復する方法である。

反復解法では、最適解 \mathbf{p} の近くでは $f(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ の勾配が 0 となることを利用して最適解を見つけようとする。ここで問題となるのは、その見つけれられた値は目的関数の局所的最小値 (local minimum) であって全域的最小値 (global minimum) すなわち真の最適解であるという保証はないということである。

あるモデル関数に対して、目的関数の真の最小値を求めるために、可能性のあるパラメータ空間の全域を探索する方法もある。パラメータの数が 1 つであればそのパラメータに対する増減を調べることで局所最適解がどのあたりにあるかを推定することができる。また、パラメータが 2 つであっても 3 次元図面を描けば比較的容易に局所的最小解の「窪み」をすべて見つけることができる。しかし、SWRC Fit の土壌水分特性モデルはいずれもパラメータの数が 4 つ以上あることから、パラメータ空間をくまなく探索して全域的最小値を求めることは大変である。そこで通常は、反復解法により真の最適解に十分に近い解が得られるものであると解釈をする。また、現実的にはパラメータが目的関数の真の最適値を与えるかどうかには大きな関心はなく、モデル関数が現実の土壌水分特性をほどよく表現していれば十分である。

SWRC Fit で使われているレーベンバーグ・マーカート法 (Levenberg Marquardt 法) は反復解法の 1 つであり、多くの非線形関数でパラメータを効率よく収束させる方法として知られている。レーベンバーグ・マーカート法は、ガウス・ニュートン法と勾配法の長所を兼ね備えるように設計された手法である。ガウス・ニュートン法は、非線形方程式の解を求めるニュートン・ラフソン法を最小二乗法に適用したようなものであり、解の近傍で極めて急速に収束するが、解から離れていると収束しない場合がある。一方で、勾配法は関数の勾配にしたがって下がる方向にパラメータを進める方法であり、解から離れていても収束しやすい。レーベンバーグ・マーカート法は、解から離れているときには勾配法のようにふるまい、近いときにはガウス・ニュートン法のようにふるまうという両者のいいところ取りをしたような手法である。Octave では、Octave-forge の `lsqr` という関数でレーベンバーグ・マーカート法が実装されているため、SWRC Fit ではこの関数を利用して最適解を求めている。

2.2. 初期値の重要性

このように、反復解法では初期値をどのように与えるかが重要である。初期値があまり良い値でなければ、反復計算により収束をしない可能性もあり、また、あまり性質のよく

ない局所的最適解に収束をしてしまう可能性がある。そこで、どのようにして良いパラメータに収束するような初期値を選ぶか、というところがポイントである。SWRC Fitが出る前は、初期値の決定を経験に頼ることがよくあった。たとえば、関（2007）で紹介されているRETICというプログラムでは、初期値を手で入力して非線形回帰を実行する。そのためには、土性から土壌水分移動パラメータを推定するPTF関数を用いて、その初期値を与える方法が主流であった。ところが、そもそも土性のデータがない場合には、PTFを使うこともできない。したがって、土壌水分特性曲線のデータだけから初期値を決めることが重要である。

実際に、著者が助手として所属していた大学の研究室では、学生が測定した土壌水分特性曲線からVGモデルのパラメータを決めるのに苦労をしていた。そのために、たとえばExcelのソルバーを使ってパラメータを決めようとしていたのであるが、うまく値を決めるためには経験と勘が必要とされていた。そのような労力を軽減して、水分特性の測定値のみから即座に最適なパラメータを決定したいという動機で開発したプログラムがSWRC Fitであり、初期値の決定をいかにしてスムーズにするかに工夫を凝らした。

SWRC Fitは、関（2007）で解説されているように、既存の土壌水分特性データベースを使って、多くのデータに対して良いパラメータに収束するように（決定係数が高いパラメータが得られるように）反復のしかたに関するパラメータや制約条件を調整しながら開発をした。

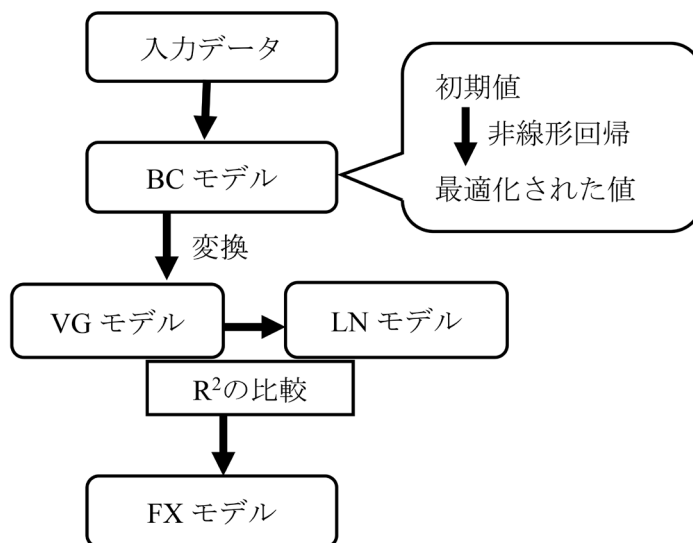


図1. SWRC Fit のパラメータ順次決定アルゴリズム

3. SWRC Fitのアルゴリズム

3.1. 初期値の順次決定アルゴリズム

図1に、SWRC Fitにおける4つの単峰性モデルのパラメータの順次決定アルゴリズムの概要を示す。まずは、入力データからBCモデルの初期値を決定し、そこから非線形回帰の反復解法によってBCモデルのパラメータを最適化する。BCモデルの最適化されたパラメータをVGモデルの値に規則的に変換して、それを初期値としてVGモデルのパラメータを非線形回帰によって最適化する。以下同様に、LNモデル、FXモデルのパラメータを順次最適化する。ここで、BC、VG、LNモデルの中ではBCモデルは単純であり、両対数グラフの2点を直線で結ぶことで簡便に初期値を推定することができる。そしてFXモデルは他のモデルと比べてパラメータの数が1つ多く、もっとも複雑なモデルである。このように、簡単に初期値を推定できるモデルから、順次より複雑なモデルへとフィッティングを進める順次決定アルゴリズムがSWRC Fitの特徴である。以下に、それぞれの初期値決定の方法を解説する。

3.2. BCモデルの初期値決定

BCモデル（関、2017の式24）の初期値は、入力データから直接決められる。ここがうまくいけば、それ以降は「ある程度確からしい値」からスタートすることができる。BCモデルは冪（べき）関数なので、基本的な考え方は簡単である。つまり、Seki (2017) の図2に記したように、BCモデルは両対数グラフ上では空気侵入値 h_b から先は直線となるため、2点を直線で結ぶだけで良いのである。空気侵入値の初期値は、有効水分が0.95を下回るような点の中で最小のサクションのデータとしている（ここで、暫定的に θ_s と θ_r をそれぞれ最大と最小の体積含水率として計算している）。そして、そのような空気侵入値の点と、有効水分が0.15を上回るような最大サクションの点を、両対数グラフで直線で結んだときの傾きから、 λ の初期値を決定している。 θ_s と θ_r についてはそれぞれ初期値をどのように与えるか、定数とするか変数として最適化するかはユーザーが設定することとなっている。

実のところはもう少し複雑な処理をしているが、それはいろいろな例外的な入力データに対して、あまりおかしい初期値を与えないようにするための処理である。あるユーザーから「この実験データではうまく収束しない」というレポートが送られてきたことがあり、そのデータを解析したところ、特殊な条件でうまく収束しないことがあることがわかった。そのため、収束しないときには初期値を少しずつ変えながら再試行をするようなコードの改良をバージョン2.0で加えた。

このようにして、きわめて特殊な例も含めて、あらゆる現実的な水分特性曲線に対して、それなりに適正なBCモデルの初期パラメータを得ることができるようになった。その初期値から非線形回帰によってパラメータを最適化することとなる。

3.3. VGモデルの初期値決定

BCモデルとVGモデルには、いずれも4つのパラメータがある。BCモデルで得られたパラメータからVGモデルの初期値を決めるためには、 θ_s と θ_e は共通しているため、残りの2つのパラメータ、すなわちBCモデルの h_b と λ から、BGモデルの α と n の初期値を決めることとなる。これはすなわち水分特性関数を $S_e(h)$ として2つのパラメータの式として考えていることとなる。VG式（関、2017の式27に式30を代入）は $\alpha h \gg 1$ のときに

$$S_e = (\alpha h)^{n-1} \quad (2)$$

と近似される。この式は、

$$\alpha = 1/h_b, n = \lambda + 1 \quad (3)$$

のときにBCモデルと $h > h_b$ で一致する。したがって、VGモデルの初期値は、BCモデルで決定された h_b と λ から、式(3)によってパラメータを変換して決定した。

3.4. LNモデルの初期値決定

LNモデル（関、2017の式42）の初期値決定については、VG式において $\alpha = 1$ として h を無次元化して n の値を変化させた曲線について、無次元化されたLN式（ $h_m = 1$ ）でフィッティングさせて σ の最適値を得るという計算を繰り返して、 n と σ の関係を調べた。すると両対数グラフが直線（ $R^2 = 0.998$ ）となったことから、 n と σ の間に冪関数

$$\sigma = 1.2(n - 1)^{-0.8} \quad (4)$$

の関係があるとして、 σ の初期値を計算した。ここで、 h を無次元化したことから、 $h_m = 1/\alpha$ とした。

3.5. FXモデルの初期値決定

FXモデルは2016年にSWRC Fitのバージョン3.0で実装されたものであり、FXモデルの初期値決定アルゴリズムについては関（2007）にもSeki（2007）にも書かれていない。

Fredlund and Xing（1994）は、FXモデルのパラメータの決め方として、水分特性曲線を描いて変曲点を読み取り、その座標と接線の傾きからおおまかなパラメータを決めることができるとしている。そこでは体積含水率に関する式が書かれているが、有効水分 S_e に関する関数としてあらわすと、変曲点の座標を（ h_p, S_{ei} ）、接線の傾きを $s = -dS_e/dh$ として（微分係数は負であるため、マイナスをつけて正の値としたものを傾きとしている）、パラメータを以下のように決めることができるとしている。

表1. VG, LN, FX モデルの変曲点の座標と接線の傾き (近似値)

	VG	LN	FX
サクシヨン h_i	$1/a$	h_m	a
有効水分量 S_{ei}	$2^{1/n-1}$	0.5	1.31^{-m}
接線の傾き s	$\frac{n(1-1/n)\alpha}{2^{2-1/n}}$	$\frac{0.399}{\sigma h_m}$	$\frac{0.269mn}{\alpha 1.31^{m+1}}$

$$a = h_i \quad (5)$$

$$m = -3.67 \log(S_{ei}) \quad (6)$$

$$n = \frac{1.31^{m+1}}{m} 3.72 s h_i \quad (7)$$

ここで、 \log は自然対数である。また、式 (5) は厳密解ではなく、およそこの程度の値ということであり、それを元として式 (6) (7) が次のように計算されることを確認できる。FX式

$$S_e = [\log(e + (h/a)^n)]^{-m} \quad (8)$$

(e は自然対数の底すなわちネイピア数) に $h = h_i = a$ を代入すると、

$$S_{ei} = [\log(e + 1)]^{-m} \approx 1.31^{-m} \approx \exp(-m/3.67) \quad (9)$$

となり、ここから式(6)が得られる。接線の傾きは S_e を微分した

$$-\frac{dS_e}{dh} = \frac{mn(h/a)^{n-1}}{a} \frac{[\log(e + (h/a)^n)]^{-m-1}}{e + (h/a)^n} \quad (10)$$

という式に、 $h = h_i = a$ を代入して

$$s = \frac{mn}{a(e + 1)[\log(e + 1)]^{m+1}} \approx \frac{0.269mn}{\alpha 1.31^{m+1}} \quad (11)$$

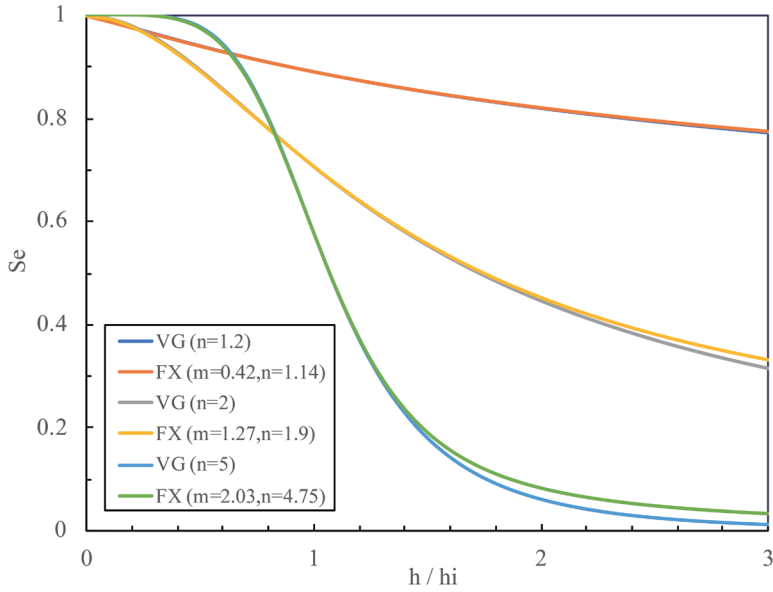


図2. VGモデルのパラメータを変換したときのFXモデルとの比較

と計算される。ここで $a = h_i$ なので、 n について解くと式 (7) が得られる。同様に、VG 式とLN式についても変曲点の座標と接線の傾きを計算したものを表1にまとめる。計算過程は付録1に記す。

SWRC Fitでは、表1の h_p , S_{ep} , s がそれぞれのモデルで等しいものとして、VGモデルあるいはLNモデルの最適化されたパラメータから、FXモデルの初期値を計算している。ここで、VGモデルとLNモデルを比較して、決定係数が大きい方のパラメータからFXモデルの初期値を決定している (図1)。

VGモデルからFXモデルへのパラメータの変換は、式 (5) (6) (7) に表1のVGモデルの式を代入することで、次のように計算される。ここで、パラメータ n はVGとFXで同じ記号となるためVGモデルの n を大文字の N とした。

$$a = h_i = 1/\alpha \quad (12)$$

$$m \approx -3.67 \log(2^{1/N-1}) \approx 2.54(1 - 1/N) \quad (13)$$

$$n \approx 0.95N \quad (14)$$

表2. VGモデルとLNモデルからのFXモデルパラメータの推定

FXモデル	VGから	LNから
a	$1/a$	h_m
m	$2.54(1-1/N)^*$	2.54
n	$0.95N$	$1.52/\sigma$

*VGモデルの n を大文字NとしてFXモデルの n と区別している

ここで、式 (14) については付録2で計算過程を記す。

図2に、VGモデルで $n=1, 2, 5$ のときに、FXモデルの m と n を式 (13) (14) から計算して、それぞれのVGモデルとFXモデルの曲線を描いた。ここで、それぞれ変曲点 h_i が1となるように横軸を無次元化している。このように、VGパラメータから変換したFXモデルの初期パラメータは、元のVG式と極めて近い曲線を描くため、この初期パラメータを元にFXモデルの最適化をすることで、より良いFXモデルのパラメータを決定できる。

次に、LNモデルのパラメータをFXモデルのパラメータに変換する方法について記す。式 (5) (6) (7) に、それぞれ表1のLNモデルの値を代入すると、以下のように計算される。

$$a = h_m \quad (15)$$

$$m \approx -3.67 \log(0.5) \approx 2.54 \quad (16)$$

$$n \approx \frac{1.31^{2.54+1}}{2.54} 3.72 \frac{0.399}{\sigma} \approx \frac{1.52}{\sigma} \quad (17)$$

以上をまとめて、VGモデルとLNモデルのパラメータから表2のようにFXモデルの初期パラメータを決定できる。

このようにして、VGモデルあるいはLNモデルのパラメータが決定されれば、それを用いてFXモデルの適度に良いパラメータを決めることができる。それを初期値として非線形回帰をすることで、FXモデルのパラメータを最適化できる。

ここで、FXモデルはVGモデルおよびLNモデルよりもパラメータが1つ多いため、最適化パラメータによってVGあるいはLNモデルではフィッティングしきれなかったような間隙径分布の歪みをあらわすことができる。そのことは、LNモデルからの変換によって明らかである。すなわち、変曲点のサクションが a に、有効水分量が m に、接線の傾きが n に、それぞれパラメータ化されているのがFXモデルであるが、LNモデルは間隙径分布が対数正規分布であることから変曲点の有効水分量が0.5となり、 $m=2.54$ という値になる。FXモデルのフィッティングをすることで m の値が変化するため、間隙径分布の歪みが調整されることとなる。

4. おわりに

本報では、水分特性曲線の非線形回帰プログラムSWRC Fit における 4つの単峰性モデルパラメータの順次決定アルゴリズム解説した。単純なモデルからはじめてより複雑なモデルのパラメータを決定することで、いずれの段階でもほどよく適合する初期値から反復計算を開始することができるため、効率よくパラメータの決定ができる。

非線形回帰の反復計算アルゴリズムでは、初期値の選び方によっては必ずしも真の最適解が得られる保証はない。したがって、SWRC Fitのアルゴリズムによるパラメータの決定が有効であるかどうかは、多くの試料に対して良いパラメータを得ることができたかどうかによって経験的に判断される。そして、すでに150件以上の論文でSeki (2007)が引用され、多くの試料でパラメータの決定に使われていることから、SWRC Fitのアルゴリズムの有効性が実証されたと著者は考えている。今後も可能な限りSWRC Fitのサービス提供を続けていきたい。

付録 1

表 1 に記載したVG式およびLN式の変曲点の座標と接線の傾きについて、計算過程を記す。VG式について、変曲点のサクション $h_i = 1/a$ は近似値である。なお対数グラフに対する変曲点については関(2017)で正確な計算方法を示した。VG式

$$S_e = [1 + (\alpha h)^n]^{1/n-1}$$

に $h=h_i = 1/a$ を代入すれば、変曲点の有効水分量については表 1 の値がただちに得られる。接線の傾き s については、 S_e を h で微分した

$$-\frac{dS_e}{dh} = \frac{n(1 - 1/n)\alpha(\alpha h)^{n-1}}{[1 + (\alpha h)^n]^{2-1/n}}$$

という式に $h=h_i$ を代入することで得られる。

LNモデルについては h_i と S_{ei} はただちに得られ、接線の傾きについては

$$x = \log(h/h_m)/\sigma$$

とした式

$$-\frac{dS_e}{dh} = -\frac{dQ(x)}{dh} = -\frac{dQ(x)}{dh} \frac{dx}{dh} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \frac{1}{\sigma h}$$

に $h=h_i=h_m$ を代入すると、 $x=0$ より

$$s = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma h_m} \approx \frac{0.399}{\sigma h_m}$$

となる。以上で表 1 のVG式とLN式の値が得られた。

付録 2

式 (14) の導出過程を記す。

$$\begin{aligned}
 n &\approx \frac{1.31^{m+1}}{m} 3.72 s h_i \quad (\text{式 (7)}) \\
 &\approx \frac{3.72 \cdot 1.31^{m+1} N (1 - \frac{1}{N})}{m 2^{2 - \frac{1}{N}}} \quad (\text{表 1 の } h_i \text{ と } s \text{ を代入}) \\
 &\approx \frac{3.72 \cdot 1.31 \cdot 1.31^{2.54(1 - \frac{1}{N})} N}{2.54 \cdot 4 \cdot 2^{-\frac{1}{N}}} \quad (\text{式 (13) を代入}) \\
 &= \frac{3.72 \cdot 1.31^{1+2.54}}{2.54 \cdot 4} \left(\frac{2}{1.31^{2.54}} \right)^{\frac{1}{N}} N \\
 &\approx 0.95 \cdot 1.007^{\frac{1}{N}} \cdot N \\
 &\approx 0.95 N
 \end{aligned}$$

引用文献

- Brooks, R. H. and A. T. Corey (1964): Hydraulic properties of porous media. Hydrol. Paper 3. Colorado State Univ., Fort Collins, CO, USA.
- Durner, W. (1994): Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. Water Resour. Res., 30(2): 211-223. doi:10.1029/93WR02676
- Fredlund, D. G. and Xing, A. (1994): Equations for the soil-water characteristic curve. Can. Geotech. J., 31: 521-532. doi:10.1139/t94-061
- Kosugi, K. (1996): Lognormal distribution model for unsaturated soil hydraulic properties. Water Resour. Res. 32: 2697-2703. doi:10.1029/96WR01776
- van Genuchten, M. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Sci. Soc. Am. J. 44:892-898.
- Seki, K. (2007): SWRC fit - a nonlinear fitting program with a water retention curve for soils having unimodal and bimodal pore structure. Hydrol. Earth Syst. Sci. Discuss., 4: 407-437. doi:10.5194/hessd-4-407-2007
- 関勝寿 (2007) 数値計算言語Octaveによる土壌水分特性曲線の非線形回帰プログラム. 土壌の物理性, 105, 2007.
- 関勝寿 (2017) 水分特性曲線の回帰プログラム SWRC Fit (1) - 水分特性モデル -.東洋大学紀要自然科学, 61: 41-6, 2017.
- 関勝寿 (2018) 水分特性曲線の回帰プログラム SWRC Fit (2) - プログラムの実行方法-.東洋大学紀要自然科学, 62: 17-24, 2018.

